

PRODUÇÃO DE UM SOFTWARE EM CÓDIGO ABERTO PARA CÁLCULO DA MASSA ESPECÍFICA DE MISTURAS A PARTIR DA EQUAÇÃO CÚBICA DE ESTADO DE PENG-ROBINSON

Felipe Pereira de Moura¹, Valesca Moura de Sousa², Mateus Pereira³, Fernanda Gonçalves de Oliveira Passos⁴, Rogério Fernandes Lacerda⁵

1 Instituto de Química – Universidade Federal Fluminense (UFF) – Niterói – RJ

2 Instituto de Computação – Universidade Federal Fluminense (UFF) – Niterói – RJ

3,4,5 Escola de Engenharia – Universidade Federal Fluminense (UFF) – Niterói – RJ

Niterói, 3 de maio de 2021.

RESUMO

Este artigo tem o objetivo de apresentar e descrever o desenvolvimento e aplicação de um software em código aberto visando a determinação da massa específica de misturas multicomponentes. O desenvolvimento deste software foi motivado, principalmente, pelo elevado custo financeiro dos atuais softwares comerciais, que torna seu uso limitado dentro das universidades e impossibilita seu uso remoto pelos alunos. O software foi chamado de Calculadora de Massa Específica, e seu desenvolvimento foi feito em Python com interface voltada ao usuário. A determinação das massas específicas se deu pela Equação de Estado Cúbica de Peng-Robinson (PREOS). A calculadora foi avaliada em testes repetitivos onde não apresentou bugs. O resultado de seus cálculos comparados a um benchmark, o UNISIM design, e seus resultados foram altamente satisfatórios, apresentando de valores exatamente iguais a afastamentos inferiores a 0,32%. A calculadora foi disponibilizada para um grupo inicial de pesquisadores, professores e alunos que relataram a aplicabilidade dela no escopo de seus trabalhos. Em seguida a calculadora foi disponibilizada publicamente para uso.

1. Aplicações

O software livre para cálculo da massa específica de mistura aqui apresentado possui diversas aplicações tanto educacionais quanto na indústria. Em ensino pode-se destacar a utilização em disciplinas como termodinâmica e fenômenos de transporte. Para a indústria, pode ser usado em oposição a parte de softwares já consagrados, como UNISIM e HYSIS, oferecendo valores de massa específica de forma mais rápida, com menor custo computacional e de forma gratuita, pertinente para previsão de escoamento, dimensionamento de bombas e acessórios de linha, cálculo de reatores e outros diversos problemas industriais.

2. Introdução

A massa específica de um fluido é uma propriedade física primordial para uma grande diversidade de projetos e estudos de engenharia, com esta grandeza se conhece o volume que um fluido ocupa, se conhece o peso que estará contido em tanques, possibilita-se o dimensionamento de bombas, determina-se o tipo de escoamento e vários outros parâmetros [1]. No Sistema Internacional a massa específica é expressa em kg.m^{-3} , usualmente, na indústria de óleo e gás, utiliza-se o grau API ($^{\circ}\text{API}$), que expressa a densidade do óleo a partir da razão entre sua massa específica e a massa específica da água, ambos a 60°F [2], segundo a Equação 1, tendo esse nome em referência a entidade que o criou, American Petroleum Institute. É bastante comum a utilização das expressões “óleo leve” ou “óleo pesado”, que apesar de ser uma nomenclatura essencialmente relacionada ao rol de óleos com os quais costuma-se trabalhar, podendo variar dependendo do país, região, empresa ou grupo de pesquisa, em geral utiliza-se como referência a faixa indicativa descrita na Tabela 1 [3].

$$^{\circ}\text{API} = \left(\frac{141,5}{\rho} \right) - 131,5 \quad \text{Eq.1}$$

Tabela 1 – Definição das classes de petróleos quanto sua densidade em $^{\circ}\text{API}$

Classe	Mínimo	Máximo
Leve	31,1	
Médio	22,3	31,1
Pesado	10,0	22,3
Extrapesado		10,0

Em muitos casos reais enfrentados na engenharia, principalmente na engenharia de petróleo em processos offshore, é muito difícil e possui um elevado custo financeiro, fazer a determinação da massa específica de certos fluidos em sua condição ambiente. Isso se dá principalmente pela elevada pressão a que os fluidos estão submetidos no leito marinho. Um poço a 2000m de profundidade, condição comum às tecnologias atuais, está

submetido a aproximadamente 200 atm. Além da dificuldade de imposição de temperatura e, principalmente, pressão, outros fatores que dificultam a medição direta da massa específica em laboratório são a reprodução idêntica da mistura e o controle do equilíbrio entre as fases líquido e gás.

Diante disso, diversos trabalhos dedicaram-se a estudar as Equações de Estado para fluidos reais, que além de considerar os parâmetros expostos anteriormente, considera também a interação (par a par, em um cálculo matricial) entre todos os componentes da mistura. A razão entre o resultado de uma Equação de Estado para fluido real e o resultado obtido pela Lei dos Gases Ideais é conhecida como fator de compressibilidade (z) [4](Equação 2).

$$P \times V_{m,ideal} = R \times T$$

$$z = \frac{V_m}{V_{m,ideal}} \quad \text{Eq.2}$$

Dentre os principais autores de versões de Equações de Estado para fluidos reais podemos destacar os que propuseram Equações Cúbicas de Estado, neste grupo têm-se Van der Waals com sua proposição que inicia a temática em 1873, Redlich-Kwong em 1949 [5], Modificação de Soave em Redlich-Kwong em 1972 [6] e Peng-Robinson em 1976 [7], amplamente utilizado para hidrocarbonetos.

Contudo, a resolução dessas equações não é simples. Para qualquer modificação na condição de trabalho exige a observação de parâmetros tabelados em *handbooks*, cálculo matricial entre os “n” componentes da mistura, cálculos de termos acessórios e, por fim, a resolução de uma equação cúbica. Atualmente, diversos softwares comerciais dedicados às engenharias já fornecem cálculos para determinação de massa específica e outras propriedades termodinâmicas, possuindo elevada confiabilidade e ampla aceitação. Neste trabalho mencionaremos o UNISIM [8], utilizado na indústria do petróleo, e que serviu de base para validação de nossos resultados.

No entanto, a utilização desses softwares comerciais possui um grande problema, o elevado preço para aquisição das licenças desses softwares. Esse problema aflige as empresas, mas é particularmente mais limitante para as universidades, uma vez que estas possuem orçamento menor e menos maleável. Essa dificuldade das universidades afeta a relação de ensino-aprendizagem que formará os futuros profissionais das empresas petrolíferas e petroquímicas. O custo financeiro elevado, mesmo das licenças dedicadas a estudantes, quando há, impossibilitam que grande parte dos alunos possam utilizar esses

softwares em casa, sendo especialmente percebido em um momento de pandemia onde as aulas estão ocorrendo em modo remoto. Mesmo nas dependências das universidades a utilização desses softwares fica restringida a computadores e disciplinas específicas, limitando-o seu uso.

3. Metodologia

3.1 A Equação de Peng-Robinson

Após estudo das Equações de Estado relatadas na literatura optou-se pela adoção da proposição de Peng-Robinson (usualmente denominada de PREOS, a partir da sigla em inglês), por tratar-se de uma metodologia mais refinada para abordagem de problemáticas envolvendo misturas das indústrias petrolíferas e petroquímicas, escopo dos trabalhos do grupo. A PREOS e seus termos podem ser observados na Equação 3.

$$Z^3 - (1 - B) \times Z^2 + (A + 2 \times B - 3 \times B^2) \times Z - (A \times B - B^2 - B^3) = 0$$

$$A = \frac{a \times \alpha \times P}{R^2 \times T^2} \quad B = \frac{b \times P}{R \times T}$$

$$a = \frac{0,45724 \times R^2 \times T_c^2}{P_c} \quad b = \frac{0,07780 \times R \times T_c}{P_c}$$

$$\alpha = \left(1 + (0,37464 + 1,54226 \times \omega - 0,26992 \times \omega^2)(1 - T_R^{0,5}) \right)^2$$

Eq.3

Para cada substância de trabalho inserida na base de cálculo é necessária a inclusão de três termos intrínsecos, pressão e temperatura críticos (P_c e T_c) e fator acêntrico (ω), todos retirados do Handbook online do National Institute of Standards and Technology (NIST) [9] e para cada par de substâncias é necessária a inclusão de um parâmetro de interação (k_{ij}), retirado da literatura.

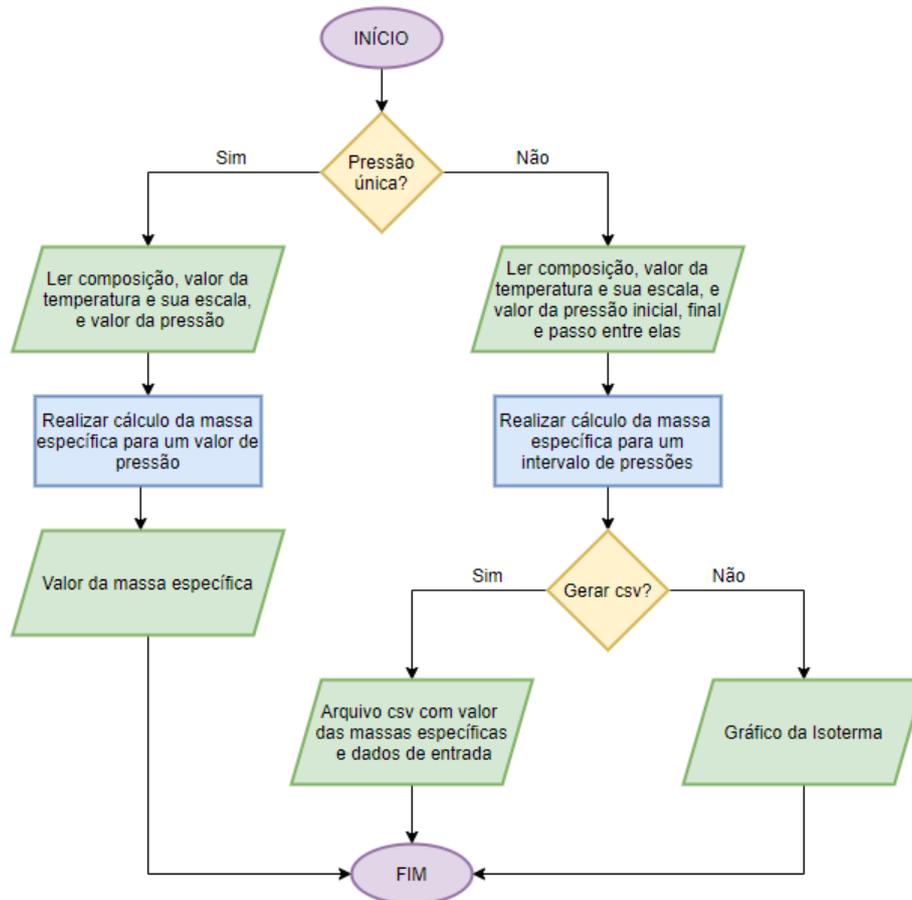
3.2 Descrição do software: calculadora de massa específica

O software foi desenvolvido em Python. Essa linguagem foi escolhida por ser aberta, de fácil sintaxe, estar em uso crescente nas universidades e no mercado, e por disponibilizar bibliotecas responsivas para etapas determinadas. No desenvolvimento da equação trabalhou-se com a biblioteca SimPy [11] e para geração de gráficos com a biblioteca Matplotlib [12]. Na parte de interface gráfica, voltada para o usuário, trabalhou-se com a biblioteca PyQt5[13] e IDLE Qt Designer [14].

A Figura 1 demonstra o funcionamento da Calculadora de Massa Específica HidroUFF. As elipses representam o início e fim do algoritmo. O losango, o

paralelogramo e o retângulo simbolizam, respectivamente, uma estrutura de decisão, dados de entrada ou saída e uma operação de processamento de dados.

Figura 1 - Fluxograma do funcionamento da Calculadora de Massa Específica HidroUFF



Ao iniciar o uso da Calculadora, é possível escolher uma entre duas opções, realizar o cálculo da massa específica para um único valor de pressão - decisão representada no fluxograma pelo rótulo “Sim” - ou para um intervalo de valores de pressão - rótulo “Não”. De acordo com essa escolha é necessário que o usuário informe dados de entrada distintos.

Se a escolha for “Sim”, o usuário deve informar o valor da pressão em atm, o valor da temperatura e sua escala (dentre as opções Fahrenheit, Celsius e Kelvin), e o valor da fração molar da(s) substância(s) que compõem a mistura. Para informar a composição basta clicar no botão “Adicionar substância”, selecionar uma das substâncias disponíveis na caixa de seleção e digitar o valor da fração molar. Podem ser adicionadas uma ou mais substâncias, sendo que o somatório das frações molares informadas deve resultar no valor 1. A inserção dos dados de temperatura é semelhante, é feita a seleção da escala na caixa de seleção e o valor da temperatura deve ser digitado. Para informar o valor da pressão

basta clicar na opção “Única” e digitar o valor da pressão. Posteriormente, nas Figuras 2 e 3(b) da Seção 4, podem ser observados os itens da interface mencionados. O próximo passo é a realização do cálculo da massa específica utilizando a equação de estado de Peng-Robinson apresentada na Equação 3, conforme explicado na Seção 3.1. Nesta etapa, além dos dados provenientes da interface com o usuário, o software utiliza dados internos, presentes no código fonte da aplicação (*hard coded*). Tais dados são referentes às propriedades específicas necessárias ao cálculo para cada uma das substâncias, como explicitado na Seção 3.1. Por fim, a saída desse cálculo é o valor da massa específica exibido para o usuário na própria interface da calculadora.

Se a decisão for “Não”, o usuário deve fornecer o valor da pressão inicial, final e o passo entre elas. Para isso, o usuário precisa escolher a opção “Intervalo” e digitar cada um dos valores nas caixas indicadas, como exemplificado na Figura 3(a) da Seção 4. Além disso, deve ser informado também o valor da fração molar da(s) substância(s) que compõem a mistura, o valor da temperatura e sua escala assim como na decisão contrária. O passo seguinte é a realização do cálculo da massa específica utilizando a Equação 3 para cada uma das pressões que compõem o intervalo. De forma similar à escolha da opção “Única”, neste passo informações provenientes do código fonte da aplicação também são utilizadas no cálculo. Por fim, como saída, é gerado um arquivo no formato CSV (*Comma Separated Values*) com o valor da massa específica para cada uma das pressões do intervalo e todos os dados de entrada fornecidos, se o usuário clicar na opção “Gerar csv”.

Em contrapartida, se o usuário clicar na opção “Gráfico da Isoterma”, a saída é o gráfico da Isoterma, com os valores de pressão (atm) no eixo x e massa específica (kg/m^3) no eixo y . Ele é gerado e exibido através de uma interface de exibição de gráficos da biblioteca Matplotlib onde o usuário pode visualizar, manipular e salvar o gráfico em diversos formatos, tais como PNG, PDF e SVG. Um exemplo dessa interface pode ser visualizado na Figura 4 da Seção 4. Ademais, o usuário pode usar seu arquivo CSV gerado pela aplicação como entrada para geração do gráfico da Isoterma. Isso pode ser realizado clicando no primeiro botão circular do canto superior direito da interface da calculadora e escolhendo o arquivo CSV desejado. Este botão pode ser visualizado na Figura 2 da Seção 4.

3.3 Validação do software: calculadora de massa específica

Após a produção da calculadora foram estabelecidas misturas padrão para determinação em paralelo na calculadora e no UNISIM, a fim de avaliar as diferenças entre os valores obtidos pelos dois softwares e validar a calculadora produzida neste trabalho frente a um software amplamente aceito e utilizado. Neste artigo apresentamos os resultados obtidos para a Mistura A, denominação dada para uma mistura composta por metano (40%), etano (30%) e dióxido de carbono (30%).

Para a avaliação de erros de programação e não conformidades na calculadora, foram realizados exaustivos testes de unidade, modificando-se os diversos parâmetros de entrada: número de componentes, os componentes, composição, temperatura e pressão.

Para a validação qualitativa da calculadora junto ao público, disponibilizou-se a calculadora, inicialmente, para professores e alunos vinculados a um mesmo grupo de pesquisa, para que estes pudessem opinar sobre correções e oportunidades de melhoria na calculadora, bem como sobre a utilidade dela em seu escopo de trabalho.

4. Resultados

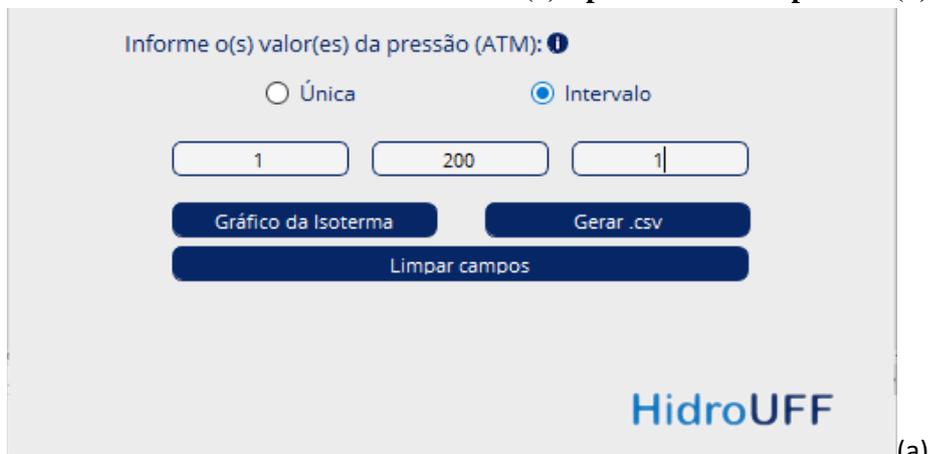
4.1 Interface da calculadora

Na Figura 2, é mostrada a visão da tela inicial da calculadora. Na Figura 3, são mostradas duas opções de apresentação dos resultados, uma para única pressão e outra para uma isoterma. Na Figura 4, um exemplo de isoterma obtida pelo programa é apresentado.

Figura 2 – Template da Calculadora de massa específica do HidroUFF.



Figura 3 – Demonstração dos dois tipos de escolha de apresentação de resultados para a Mistura A: Sob a forma de uma isoterma (a) e para uma única pressão (b).

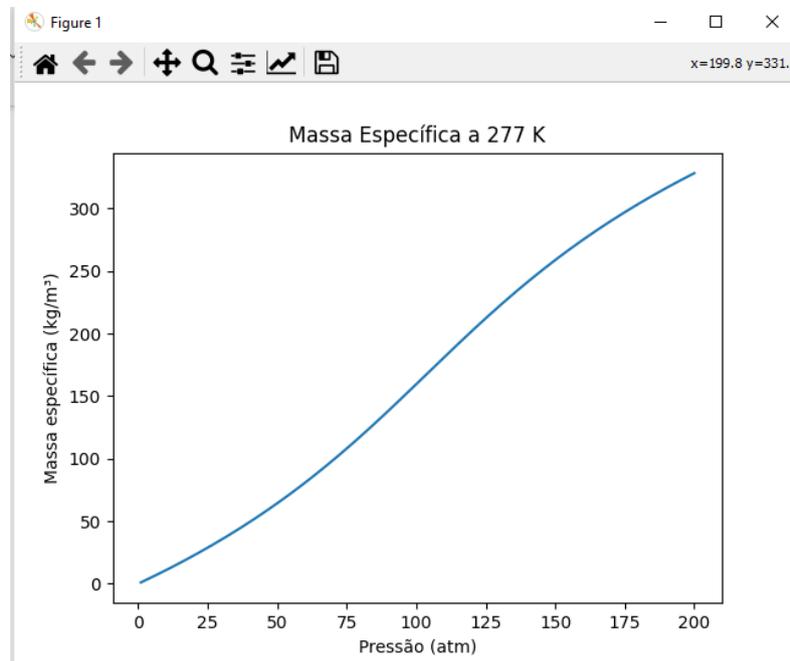


(a)



(b)

Figura 4 – Isoterma (a 277K) de variação de massa específica da Mistura A entre 0 e 200 atm, extraída do programa.



4.2 Comparação dos valores obtidos na calculadora com software comercial

Os resultados de massa específica obtidos com a calculadora foram similares aos encontrados na literatura e em softwares já consagrados no mercado, para todas as misturas propostas, obtendo valores exatamente iguais ou com desvios relativos consideravelmente baixos. Os valores obtidos para a Mistura A, pela calculadora e pelo UNISIM, podem ser observados nas Tabela 2 e Tabela 3. O desvio de valores na ordem de 0,004% a 0,32%, caracteriza-se como um afastamento simples devido ao truncamento dos cálculos, não caracterizando-se como erro.

Tabela 2 – Comparação entre os valores de massa específica, em kg.m^{-3} , obtidos pela Calculadora HidroUFF e pelo software comercial UNISIM para a Mistura A em condição isotérmica (4°C)

Pressão (atm)	Calculadora HidroUFF (UNIDADES)	UNISIM Honeywell	Desvio Relativo
1	1.27	1.27	0%
10	13.34	13.33	0.08%
50	91.57	91.73	-0.17%
100	307.32	308.30	-0.32%
200	464.12	464.30	-0.04%
300	527.68	527.70	-0.004%

Tabela 3 – Comparação entre os valores de massa específica, em Kg.m^{-3} , obtidos pela Calculadora HidroUFF e pelo software comercial UNISIM para a Mistura A em condição isobárica (200atm)

Temperatura $^{\circ}\text{C}$	Calculadora HidroUFF	UNISIM Honeywell	Desvio Relativo
1	474.02	473.80	0.05%
5	461.44	461.20	0.05%
10	445.69	445.50	0.04%
50	329.77	329.80	-0.01%
75	276.30	276.30	0%
100	237.51	237.50	0.004%

Com a avaliação por testes exaustivos verificou-se que calculadora não apresenta não-conformidades que impedissem a obtenção de resultados corretos ou que prejudicassem a utilização do programa, estando a calculadora apta para utilização pelos potenciais usuários.

Com a utilização preliminar por professores, pesquisadores e alunos vinculados ao grupo de pesquisa do HIDROUFF, foi possível observar a partir de relatos desses usuários que a calculadora foi considerada relevante para o trabalho, intuitiva, de fácil manuseio, de baixo custo computacional e vantajosa por ser gratuita.

Em uma comparação prática que demonstra a necessidade de uma ferramenta confiável para estipular a massa específica de uma mistura, trabalhou-se com o problema prático do laboratório: A determinação do diâmetro equivalente (d_e) de uma bolha em ascensão em um líquido. Esse problema laboratorial é um retrato de uma situação-

problema real, em condições como vazamentos submarinos, por exemplo. Uma forma de determinar esse diâmetro utiliza a equação (Equação 4) proveniente da Lei de Tate (adaptada) [15].

$$d_e = \left(\frac{f \times \pi \times d}{(\rho_l - \rho_g) \times g} \right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{eq.4}$$

Onde, f é um fator de contração para cada orifício injetor de gás, determinado experimentalmente por uma amostra de massa específica conhecida (adotaremos aqui como 0,6), d é o diâmetro interno do orifício (adotaremos como 1mm ou 0,001m), ρ_l e ρ_g são, respectivamente, a massa específica do líquido e do gás e g a gravidade.

Sendo assim pode-se estudar um caso de ascensão de bolhas de uma mistura padrão em água a temperatura e pressão ambientes (20°C e 1 atm), um experimento facilmente preparado no laboratório onde tanto a massa específica do gás como o diâmetro da bolha podem ser medidos experimentalmente por um densímetro digital e por câmera fotográfica com posterior tratamento em software como o AutoCAD, respectivamente. Para esse caso tem-se a resolução na Equação 5.

De mesmo modo, pode-se estudar um segundo caso, fora das possibilidades de trabalho em um laboratório convencional, sob a condição de 2000m de profundidade em um oceano (4°C e 200 atm). Para essa condição faz-se necessário o uso da calculadora de massa específica, bem como o diâmetro equivalente da bolha em ascensão passa a ser aceito unicamente pelo resultado da equação, não sendo possível a observação direta no escopo do laboratório, conforme Equação 6.

$$d_e = \left(\frac{0,6 \times \pi \times 0,001}{(998 - 1,2525) \times 9,81} \right)^{\frac{1}{3}} = 0,00578\text{m ou } 5,78\text{mm} \quad \text{Eq.5}$$

$$d_e = \left(\frac{0,6 \times \pi \times 0,001}{(998 - 490,29446) \times 9,81} \right)^{\frac{1}{3}} = 0,00723\text{m ou } 7,23\text{mm} \quad \text{Eq.6}$$

Outra demonstração da utilização da calculadora, ainda no âmbito do problema de bolhas em ascensão, é a dinâmica de bolhas de ar atmosférico e água. Para tal, foram realizados testes em laboratório com um tanque onde era inserido ar atmosférico de um compressor por um bocal. Variou-se o diâmetro do bocal (1,0, 2,0 e 5,0mm) mantendo-se os demais parâmetros, inclusive a vazão muito baixa, condição quase-estática. Para cada diâmetro de bocal foram executados 7 testes a fim de avaliar a repetibilidade do método.

As bolhas produzidas eram contadas e capturadas em uma proveta invertida no tanque. O volume de ar foi determinado e dividido pelo número de bolhas para obtenção do volume de cada bolha. A raiz cúbica desse volume é o diâmetro equivalente.

De maneira análoga, utilizou-se a calculadora para pressupor a massa específica do ar atmosférico (obtendo o resultado de $1,28547 \text{ kg.m}^3$) e este dado foi utilizado na equação de Tate adaptada (com fator de contração f previamente determinado como 0,25), conforme visto em Equação 4. Os cálculos podem ser vistos na Equação 7. A comparação entre os valores reais obtidos em laboratório e os valores modelados pela equação de Tate utilizando o resultado do cálculo de massa específica do ar atmosférico pode ser observada na Tabela 4.

$$d_e = \left(\frac{0,25 \times \pi \times 0,001}{(998 - 1,28547) \times 9,81} \right)^{\frac{1}{3}} = 4,31 \text{ mm}$$

$$d_e = \left(\frac{0,25 \times \pi \times 0,002}{(998 - 1,28547) \times 9,81} \right)^{\frac{1}{3}} = 5,44 \text{ mm}$$

$$d_e = \left(\frac{0,25 \times \pi \times 0,005}{(998 - 1,28547) \times 9,81} \right)^{\frac{1}{3}} = 7,38 \text{ mm}$$

Eq.7

Tabela 4 – Comparação entre os valores de massa específica, em Kg.m^{-3} , obtidos experimentalmente e por previsão da massa específica inserida na equação de Tate.

Diâmetro interno do bocal	Total de testes realizados	Range de d_e (mm)	d_e calculado (mm)
1 mm	7	4,1 – 4,5	4,31
2 mm	7	4,8 – 5,9	5,44
5 mm	7	6,4 – 8,2	7,38

4.3 Avaliação de erros e resposta dos usuários

A calculadora de massa específica, após sua validação, foi disponibilizada de forma pública no site do Laboratório de Hidráulica da UFF (HIDROUFF) [17] para utilização de toda a comunidade acadêmica interna e externa. Além disso, o código fonte da aplicação também foi disponibilizado, de forma aberta, em um repositório do GitHub

[18]. Ademais, a Calculadora de Massa Específica HidroUFF foi publicada no repositório da plataforma Zenodo que pode ser consultado em [19].

Os professores de disciplinas ligadas ao curso de graduação de Engenharia de Petróleo da UFF passaram a difundir essa calculadora para seus alunos como alternativa aos softwares pagos que os alunos, em sua grande maioria, só conseguiam utilizar nos laboratórios da universidade. Pretende-se avaliar quantitativamente a opinião dos alunos sobre a calculadora, em etapa futura, através de formulários.

A utilização da calculadora pela comunidade acadêmica fica ainda mais interessante para a dinâmica das disciplinas uma vez que as aulas estão sendo ministradas de maneira remota devido a pandemia de COVID 19 e torna cada vez mais necessária a utilização de softwares gratuitos, intuitivos e de baixo custo computacional para que alunos e professores possam usar em seus computadores pessoais durante as aulas.

5. Conclusão

A Calculadora HidroUFF de massa específica mostrou-se eficiente para utilização tanto em ensino quanto em pesquisa, gerando resultados similares aos encontrados na literatura e em outros programas, além de possuir a vantagem de ser uma alternativa de baixo custo computacional e gratuita que pode ser utilizada por profissionais e alunos tanto na universidade como em tarefas remotas.

Atualmente a calculadora já é utilizada pelo Grupo HidroUFF em seus trabalhos de pesquisa, e disponibilizada para ser baixada pelos alunos de disciplinas como a termodinâmica, a mecânica dos fluídos e de engenharia de petróleo.

6. Próximas Atividades

- Incluir mais substâncias disponibilizadas no código do software;
- Acrescentar o cálculo de Flash para determinação da razão das fases líquido e gás;
- Incluir módulo que permita ao usuário introduzir propriedades de substâncias ainda não incluídas no código fonte do software via entrada de arquivo CSV (Comma-separated values) ou edição de um banco de dados do software.
- Avaliar quantitativamente a aceitação da calculadora na comunidade acadêmica através de *survey*.

- Extrapolar resultados reais de laboratório para cenários de maior pressão, como o leito marinho em lâminas d'água de até 2000m.

7. Referências Bibliográficas

- [1] LORIA, Herbert; PEREIRA-ALMAO, Pedro; SATYRO, Marco. Prediction of Density and Viscosity of Bitumen Using the Peng–Robinson Equation of State. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 48, n. 22, p. 10129-10135, 18 nov. 2009. American Chemical Society (ACS). <http://dx.doi.org/10.1021/ie901031n>.
- [2] AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. ASTM D287 - 12B: Standard Test Method for API Gravity of Crude Petroleum and Petroleum Products (Hydrometer Method). Pensilvânia: ASTM 2019.
- [3] FERREIRA, Fernando Guimarães. CLASSIFICAÇÃO DE PETRÓLEOS. 2018. 119 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Elétrica, Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia (Coppe), Ufrj, Rio de Janeiro, 2018.
- [4] BORGES, Edilson Macedo Lopes. Avaliação de Correlações e Equações de Estado para Determinação de Fatores de Compressibilidade de Gás Natural. 2009. 218 f. Dissertação (Mestrado em Processos Químicos e Meio Ambiente) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.
- [5] REDLICH, Otto.; KWONG, J. N. S.. On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions. **Chemical Reviews**, [S.L.], v. 44, n. 1, p. 233-244, fev. 1949. American Chemical Society (ACS).
- [6] SOAVE, Giorgio. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. **Chemical Engineering Science**, [S.L.], v. 27, n. 6, p. 1197-1203, jun. 1972. Elsevier BV.
- [7] PENG, Ding-Yu; ROBINSON, Donald B. A new two-constant equation of state. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, v. 15, n. 1, p. 59-64, 1976.
- [8] UNISIM Design. Versão R.460.1. Honeywell. 2018.
- [9] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY (Estados Unidos). **Propriedades termofísicas de sistemas fluidos**. 2018. Disponível em: <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>. Acesso em: 03 maio 2021.
- [10] Van Rossum, G., & Drake Jr, F. L. (1995). *Python reference manual*, Technical Report CS-R9526. Centrum voor Wiskunde en Informatica Amsterdam.
- [11] SimPy (2021). Uma biblioteca Python para matemática simbólica. <https://www.sympy.org>. Acessado em abril de 2021.
- [12] Matplotlib (2021). Visualização com Python. <https://matplotlib.org>. Acessado em abril de 2021.
- [13] PyPI (2021). PyQt5: Python bindings for the Qt cross platform application toolkit. <https://pypi.org/project/PyQt5>. Acessado em abril de 2021.
- [14] The Qt Company. (2021). Qt Designer Manual. <https://doc.qt.io/qt-5/qt designer-manual.html>. Acessado em abril de 2021.

[15] TATE, T..(1864). On the magnitude of a drop of liquid formed under different circumstances. The London, Edinburgh, And Dublin Philosophical Magazine And Journal Of Science. v. 27, n. 181, p. 176-180. Informa UK Limited. <http://dx.doi.org/10.1080/14786446408643645>.

[16] HIDROUFF - LABORATÓRIO DE HIDRÁULICA (Estados Unidos). Utilidades e Links: calculadora de massa específica de misturas. Calculadora de massa específica de misturas. 2021. Disponível em: <http://hidrouff.sites.uff.br/utilidades/>. Acesso em: 03 maio 2021.

[17]GitHub (2021). Repositório HidroUFF/calculadora-massa-especifica. <https://github.com/HidroUFF/calculadora-massa-especifica>. Acessado em abril de 2021.

[18] Valesca Moura de Sousa, Mateus Pereira de Sousa, Elson Antonio do Nascimento, Felipe Pereira de Moura, Fernanda Gonçalves de Oliveira Passos, Rogério Fernandes de Lacerda. (2021, March 29). HidroUFF/ Calculadora de Massa Específica HidroUFF - v1.0.0 (Version v1.0.0). Zenodo. <http://doi.org/10.5281/zenodo.4646222>